

А. Ю. Чудинов, А. Д. Новокрещенова

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
г. Екатеринбург

**d.v.gadeev@urfu.ru*

Научный руководитель – доц., канд. техн. наук *Д. В. Гадеев**

ПРИМЕНЕНИЕ САМООБУЧАЮЩИХСЯ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

В работе рассмотрена технология искусственных нейронных сетей для моделирования процессов и явлений в материаловедении.

Ключевые слова: моделирование, самообучающиеся алгоритмы, нейронные сети, машинное обучение.

A. Yu. Chudinov, A. D. Novokreshhenova

THE USE OF LEARNING ALGORITHMS IN MATERIALS SCIENCE

The technology of artificial neural networks for material science issues is considered.

Keywords: modelling, learning algorithms, artificial neural networks, machine learning.

В связи с тем, что объем данных, полученных в ходе различных экспериментов или зафиксированных датчиками показаний на производстве, продолжает расти быстрыми темпами, существует значительный потенциал в разработке и производстве новых материалов, а также выявлении новых, ранее не известных, тенденций и зависимостей с помощью новых вычислительных методов, которые известны как самообучающиеся алгоритмы. Без использования подобных алгоритмов, которые позволяют связать данные в единое целое, большая часть этого богатства остается неразведанной.

В таких традиционно инновационных сферах, как информационные технологии и медицина, подобные подходы в последние годы нашли самое широкое применение, в частности, при обработке изображений из научных публикаций, диагностике онкологических заболеваний или даже обработке результатов анализов крови. В свою очередь, в традиционно консервативных областях, таких как металлургия, их применение остается ограниченным.

Однако в последние годы в научной литературе начинает появляться все больше публикаций о перспективности применения технологий

«машинного обучения» для задач материаловедения. Например, в [1] отмечается, что искусственные нейронные сети (*Artificial Neural Network, ANN*) являются очень мощным инструментом при анализе сложных и нелинейных зависимостей между составом материала и его свойствами. В свою очередь, искусственная нейронная сеть – это вычислительный метод, который пытается эмулировать процессы, протекающие в мозге человека и нервной системе в целом при распознавании образов, фильтрации данных и контроле над техническими процессами [2, 3].

Применение нейронных сетей позволяет решить три основные проблемы использования линейной регрессии и других подобных методов, а именно: выражение (вид) для гипотезы должны быть выбрано в самом начале построения модели; выражение гипотезы чаще всего является линейной функцией или полиномом; уравнение-гипотеза является чаще всего не меняющимся для разных значений входных параметров [1]. Последнее, однако, часто оказывается некорректным с точки зрения физики описываемого процесса. Например, модели, связывающие прочность стали с содержанием углерода, должны кардинально отличаться для низкоуглеродистых и ледебуритных сталей.

Основной идеей нейронных сетей является аппроксимация сложных зависимостей путем применения нелинейных преобразований (функций активации) над линейными (взвешенный вход нейронов) и в соответствии с теоремой Цыбенко (*universal approximation theorem*) [4] подобный подход позволяет описать функцию любой сложности. В частности, на рис. 1 представлена схема простой трехслойной нейронной сети, позволяющей определить температуру начала бейнитного превращения по химическому составу стали [1].

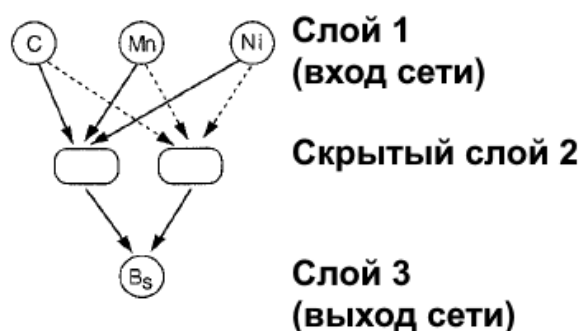


Рис. 1. Схема простой трехслойной нейронной сети

Входными данными для такой нейронной сети является содержание химических элементов в стали, а выходом (значением гипотезы) – прогнозируемая температура начала бейнитного превращения. Сеть работает следующим образом: на вход каждого нейрона из второго (скрытого) слоя, у каждого из которых есть определенный вес ω_i ,

поступают данные от всех нейронов предыдущего слоя. Каждый нейрон рассчитывает значение «взвешенного входа» $z = \sum(\omega_i x_i + \omega_0)$, где ω_0 – аналог свободного члена в выражении линейной функции $kx+b$, вычисляет значение функции активации $a_i = f(z)$ и передает это значение на вход всех нейронов следующего (выходного) слоя. Выходной нейрон для задач регрессии чаще всего в качестве выходного значения вычисляет взвешенный вход и возвращает его в качестве значения текущей гипотезы без вычисления функции активации.

Задача обучения нейронной сети, таким образом, заключается в нахождении весов ω_i и ω_0 всех нейронов сети.

В свою очередь, функцией активации может являться любая нелинейная функция, например, сигмоидальная функция ($\frac{1}{1+\exp(-z)}$) или гиперболический тангенс ($\tanh(z)$). В последние годы, однако чаще всего в качестве функции активации, особенно для задач классификации, применяется функция *rectified linear unit (ReLU)*, которая математически выражается следующим образом: $\max(0, z)$, преимуществом которой является низкая вычислительная сложность расчета как самой функции активации, так и ее производной, что важно для повышения скорости обучения нейронной сети [5].

Потенциальной проблемой использования сложных нелинейных преобразований входных данных, примером чего являются нейронные сети, является высокая склонность к «переобучению» сети на обучающих данных и плохая склонность к обобщению на новых данных (рис. 2).

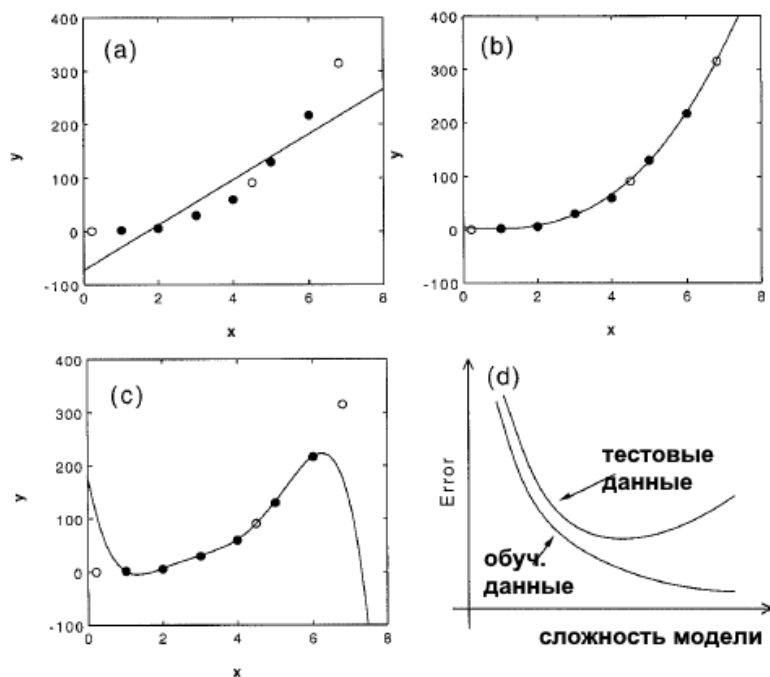


Рис. 2. Недообучение и переобучение нейронной сети [1]

Так, вполне естественно, что ошибка модели на обучающих данных снижается с увеличением сложности модели (например, путем увеличения количества нейронов в скрытых слоях или увеличения количества слоев), однако зависимость ошибки модели на новых данных, не использованных для ее обучения, носит иной характер (рис. 2, *d*). В случае, когда модель является слишком простой для описания имеющихся взаимосвязей (рис. 2, *a*), то ее ошибки при прогнозировании оказываются большими как на обучающей части, так и на проверочных данных (рис. 2, *d*). В свою очередь, чрезмерно переусложненная модель (рис. 2, *c*) показывает хорошие результаты (низкую ошибку) на обучающих данных (темные точки), однако оказывается совершенно неспособной к прогнозированию новых результатов (светлая точка) (рис. 2, *d*). Поэтому при применении нейронных сетей всегда требуется поиск таких архитектур сети, которые обеспечивают минимальную ошибку не только при обучении, но и при проверке на новых данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке постановления № 211 Правительства Российской Федерации, контракт № 02.А03.21.0006, в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ, проект № 11.1465.2014/К

ЛИТЕРАТУРА

1. Bhadeshia, H. K. Neural Networks in Materials Science ISI International, 1999. Vol. 39. №. 10. P. 966–979.
2. D. Graupe. Principles of Artificial Neural Networks—Advanced Series on Circuits and Systems // World Scientific Publishing, Singapore: 1997. Vol. 3
3. Computational Materials Science 2005. Vol. 32. P.1–12.
4. Cybenko, G. V. Approximation by Superpositions of a Sigmoidal function, Mathematics of Control Signals and Systems, 1989. Vol. 2. №. 4. P. 303-314.
5. Digital selection and analogue amplification coexist in a cortex-inspired silicon circuit. R Hahnloser [et. al.] // Nature. 2000. Vol. 405. P. 947–951.